小型ハイブリッド処理システムと微分方程式の解法(数式処理と数学研究への応用)

岩下, 英俊; 野田, 松太郎

数理解析研究所講究録
612巻 1987年 78-89

小型ハイブリッド処理システムと微分方程式の解法

愛媛大学・工学部　岩下　英俊、野田松太郎
(Hidetoshi Iwashita, Matsutaro Noda)

1. はじめに

近年、数式処理システムの利用の広まりは急速で数学・物理学（とりわけ高エネルギー物理学）等にとどまらず各種の工学分野や教育の分野でも活用されて来ている。数式処理を用いると従来の数値計算によるものとは違って、正確な数式変形が可能であり「誤差」を気にすることのない計算ができる。さらに、計算機の利用の便の進歩、その高速化、記憶容量の大規模化等がシステム普及の因と思われる。しかし、より一層の利用の容易さや各分野での利用の利点を考えるには数式変形と数値計算の結合やシステムの小型化あるいは利用環境の向上が望まれる。

そこで、我々は PROLOG で記述した、パソコン上で稼働する小型で移植性に富む数式・数値ハイブリッド処理システムを作成している。[1]このシステムでは、通常の形態で入力された数式が色々な数式変形をうけた後、見やすい形式での数式の出力や数値計算で効率的とされる形式に変換しての FORTRAN プログラムの出力あるいはその数値計算の実行などを行うことができる。以下、このシステムの動作を常微分方程式の初期値問題の求解に関して述べる。具体的な

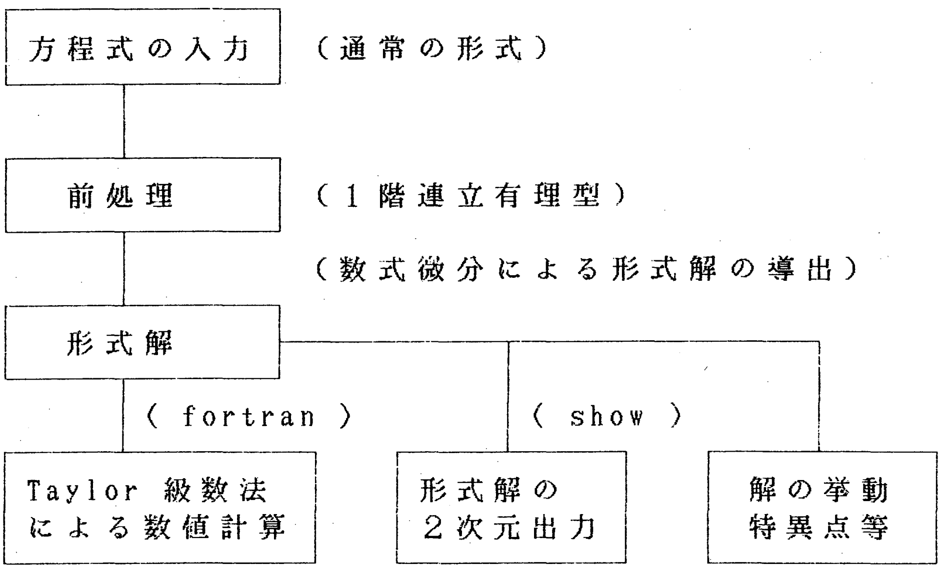
アルゴリズムとして、数値計算の分野で確立されている Taylor 級数法に対して、１）数値計算プログラム（ FORTRAN ）の作成、２）２次元出力、３）数値計算の実行と Taylor 級数法の有効性について考察する。特に、アルゴリズムをハイブリッド化することにより従来用いられている数値計算的手法が変化するか否かに注目する。また、ハイブリッド処理システムでの Taylor 級数法はいくつかの問題に対して数値計算法として良く知られている Runge-Kutta 法よりも優れた面があることがわかる。

2. 常微分方程式に対する Taylor 級数法

Taylor 級数法は微分方程式の解をもとめるために最も基本的な解法である。 Taylor 級数法の効果的な遂行には与えられた方程式の右辺の１階連立有理型化の前処理、微分演算による形式解、その数値の計算の過程が重要である。特に高階微分の計算の必要性により数値計算法としてはあまり一般的にはなっていない。現在、数値計算アルゴリズム化されているものは FORTRAN の pre-compiler として発表されている。[2),3),4)]この方法は、 FORTRAN 等、記号処理に不適切な言語処理系のみを考慮したため微分演算を避けることに主眼があり複雑な再帰的演算を行っている。まず常微分方程式の右辺を基本関数（二項演算（＋，－，•，／）、単項演算（符号、積分記号）、べき乗、log、exp、sin、cos 等）のみの有理型で書く。さらに Taylor 展開の第 j 展開係数 $y_i^{(j)}$ に対し $y_i = \int T_m$ と補

助変数を導入し、これを再帰的に $y_i^{(j)} = T_m^{(j-1)}/j$ とおく。多くの補助変数により方程式の右辺 $f_i(x, y_i(x))$ を表わすと、基本関数に関して定められた再帰関係のみにより高次の展開係数を計算することが出来る。この方法は高速化、高精度等の点で有効ではあるが大変煩雑であり、さらに、pre-compiler は限られた一部の計算機の上でしか稼働しないため十分な利用もできない。

これに対し、ハイブリッド処理システムでは上で用いられた再帰的演算を容易に遂行できるのみならず、数式微分の採用そのものも可能である。方程式の複雑化と共に数式微分を採用した方法が計算速度の面で優位であることが分かる。そこで以下では、数値計算の分野で用いられてきた Taylor 級数法の中、再帰関係を用いる部分のみを捨て、数式微分による方法を用いて Taylor 級数法をシステムに組み込む。その動作の概略を図に示す。



3. システムの動作と諸機能

図にも示したようにシステムでは、方程式の入力、色々な前処理あるいは数式微分等を記号的に行うことによって Taylor 級数法による微分方程式のべき級数解を求める。本来 Taylor 級数法は数値計算用のアルゴリズムであるので、形式解は FORTRAN による数値計算プログラムに直される必要がある。この間の結合が効率的に成されるなら、形式解はさらに多方面へも様々に利用され得る。

FORTRAN プログラムの出力・実行

与えられた微分方程式の次数等を識別して自動的に Taylor 級数法のプログラムの作成をする。べき級数の計算では、演算の手間の点で優位な horner 法にもとづくプログラムが作られる。ここで作られた副プログラムはシステム内にたくわえられた主プログラムと結合され実行される。この操作は述語 fortran によって次図のようになされる。ここで下線部が利用者による入力である。

```
root/user/?-system.
How many equations ? 1   ( 方程式の数 )
1> y''=y+sin(2*y)     ( d2y/dx2=・・・ )
independent variable = x
Wait....
root/user/?-expand.        ( Taylor 展開 )
order = 10                 ( 10 次まで )
root/user/?-fortran.       ( FORTRAN 実行 )
   ( FORTRAN コンパイラのメッセージ )
   ( 結果の出力 )
root/user/?-exec('type evalsub.f77').
   ( FORTRAN サブプログラムの表示 )
```

ハイブリッド処理システムに導入したTaylor級数法を、代表的な数値解法であるRunge-Kutta法と比較すると、明らかに入力の容易さではTaylor級数法が優れている。さらに精度面でもTaylor級数法では高次項を取り入れているので（上の例では10次）高精度計算がが期待される。いくつかの具体的な計算結果を以下に示す。

例1.　16次 Bessel関数：　$y''=((16/x)^2-1)y - y'/x$

初期値　$y(6)= 1.2019499\times10^{-6}$, $y'(6)= 2.9864798\times10^{-6}$

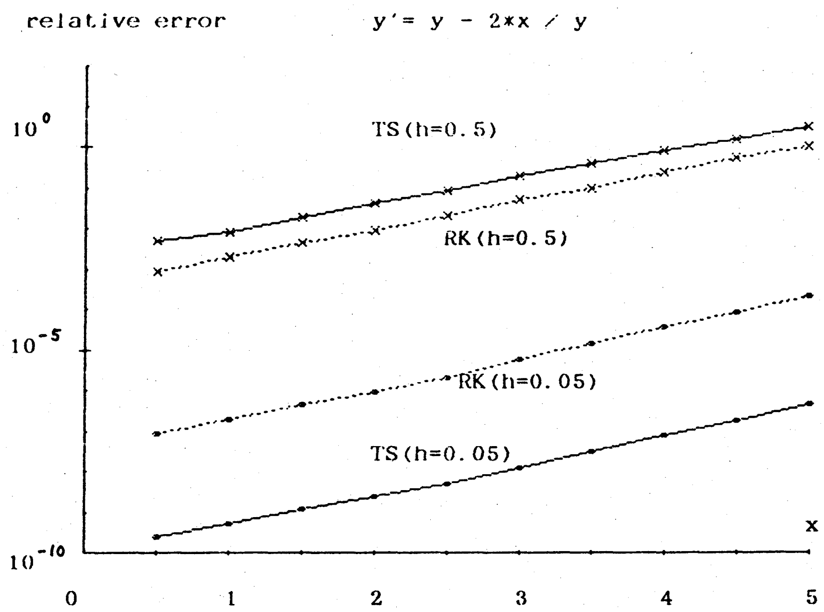
次表のように、Taylor級数法による解は十分な精度を持つ。

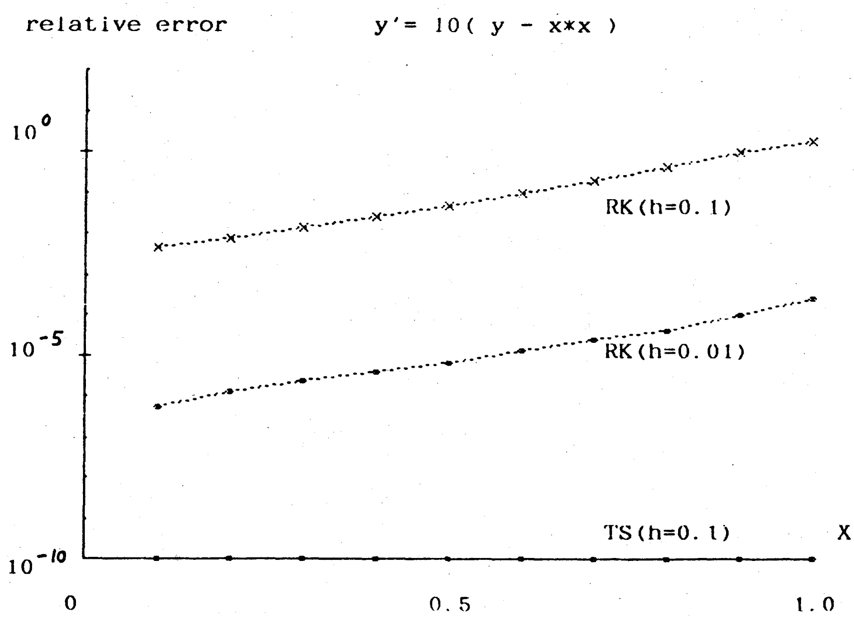
x	exact (J_{16})	Taylor		Runge-Kutta	
		h=1.0	h=0.1	h=1.0	h=0.1
6	1.2019-6	1.2019-6	1.2019-6	1.2019-6	1.2019-6
7	1.1612-5	1.1612-5	1.1612-5	1.0915-5	1.1611-5
8	7.8006-5	7.8007-5	7.8006-5	7.0317-5	7.8002-5
9	3.9330-4	3.9334-4	3.9330-4	3.4643-4	3.9327-4
10	1.5667-3	1.5667-3	1.5667-3	1.3630-3	1.5666-3
11	5.1100-3	5.1100-3	5.1100-3	4.4169-3	5.1097-3
12	1.3991-2	1.3991-2	1.3991-2	1.2054-2	1.3990-2
13	3.2724-2	3.2725-2	3.2724-2	2.8149-2	3.2722-2
14	6.6132-2	6.6133-2	6.6132-2	5.6848-2	6.6128-2
15	1.1617-1	1.1617-1	1.1617-1	9.9832-2	1.1616-1
16	1.7745-1	1.7745-1	1.7745-1	1.5246-1	1.7744-1
17	2.3400-1	2.3400-1	2.3400-1	2.0103-1	2.3399-1
18	2.6108-1	2.6108-1	2.6108-1	2.2426-1	2.6106-1
19	2.3446-1	2.3446-1	2.3446-1	2.0140-1	2.3444-1
20	1.4517-1	1.4518-1	1.4517-1	1.2479-1	1.4517-1
21	1.2018-2	1.2018-2	1.2018-2	1.0604-2	1.2018-2

例 2. 方程式 $y' = y - 2x/y$ 初期値 $y(0)=1$

例 3. 方程式 $y'=10(y - x^2)$ 初期値 $y(0)=0.02$

これらに対する相対誤差が次の2つの図に示される。





例２の場合、きざみ幅 h = 0.5 での Taylor 級数法（ TS ）の含む誤差は Runge-Kutta 法（ RK ）にやや劣るが、 h = 0.1 では逆転していることがわかる。一方、例３の場合は形式解のべき級数が途中で切れる場合である。この様な場合にも Runge-Kutta 法での計算は誤差を含んだまま続けられるが、Taylor 級数法では誤差のない結果を生じている。以上の例のような Taylor 級数法の精度面での優秀さは Barton [4] 等によっても示されているが、本論のようにこれをハイブリッド処理システム上に実現することにより、大規模で移植性のない pre-compiler を考える必要がなくなる。比較は高次の Runge-Kutta 法との間で行われるべきであるが、高次の Runge-Kutta 法やその改良版は計算量も多くパソコン等では効率的ではない。さらに、後にも述べるが同一の形式解を利用して係数の変化などのみの計算を繰り返す場合にはここでの方法が優位である。これらを総合してハイブリッド処理での Taylor 級数法が数値解法としても優れているといえる。

また、数値計算は PROLOG に付加されている機能により ＯＳ に戻ることなく行われる。このため、数値計算で求められた諸結果を利用してさらにあらたな数式処理計算を行うことも可能となり、より高度なハイブリッド処理も可能となる。

<u>形式解の出力</u>

一般に Taylor 級数展開された数式は長くかつ複雑で、視覚的に

十分理解されるような形式での出力が望まれる。これに対し、本システムでは述語 show による2次元出力を可能にしている。このような出力の方法は MACSYMA 等の大型機用の数式処理システムに見られるのみである。述語 show の利用を下に示す。上で Taylor 級数法のために入力された2次の微分方程式 y''= ・・・ の形式解が y1 として示されている。

```
root/user/?-show.


                               y10 + y30           2     2 y20 y40 +
y1 = y10 + y20 (x - x0) + --------- (x - x0)  + -----------
                                  2                          6
                                             2
y20          3    2 y10 y40 + y10 - 4 y20   y30 + 2 y30 y40 + y
---(x - x0)   + --------------------------------------------
                                            24

30          4
--(x - x0)   + ...
```

特異点の探索

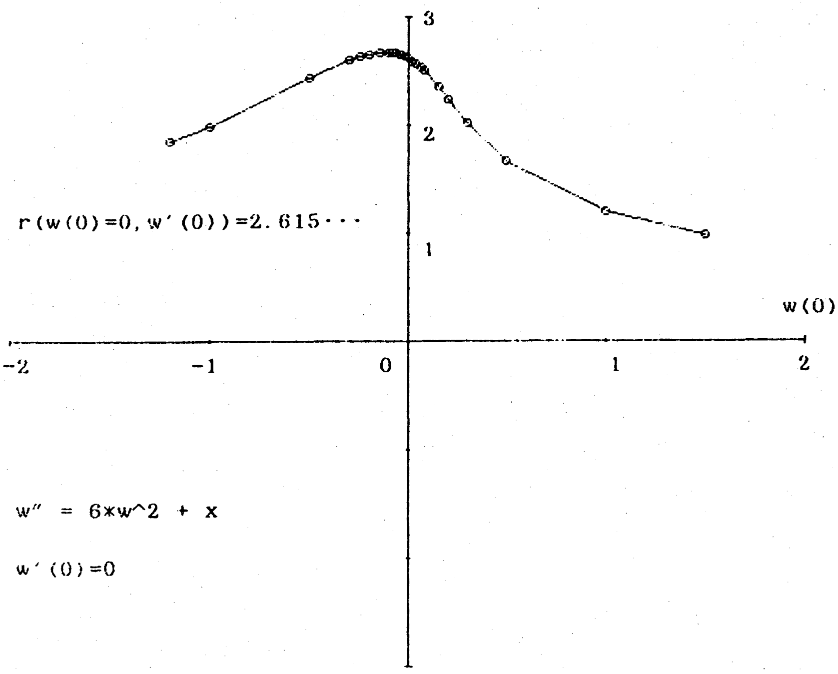
数式的に得られた形式解はそれを利用して数値解を求めること以外の多くの問題へ適用される。ここでは、その一つとして微分方程式の特異点の位置を探索する問題を考える。この場合も FORTRAN 出力により、3項解析の数値計算を遂行する。べき級数で書かれた解

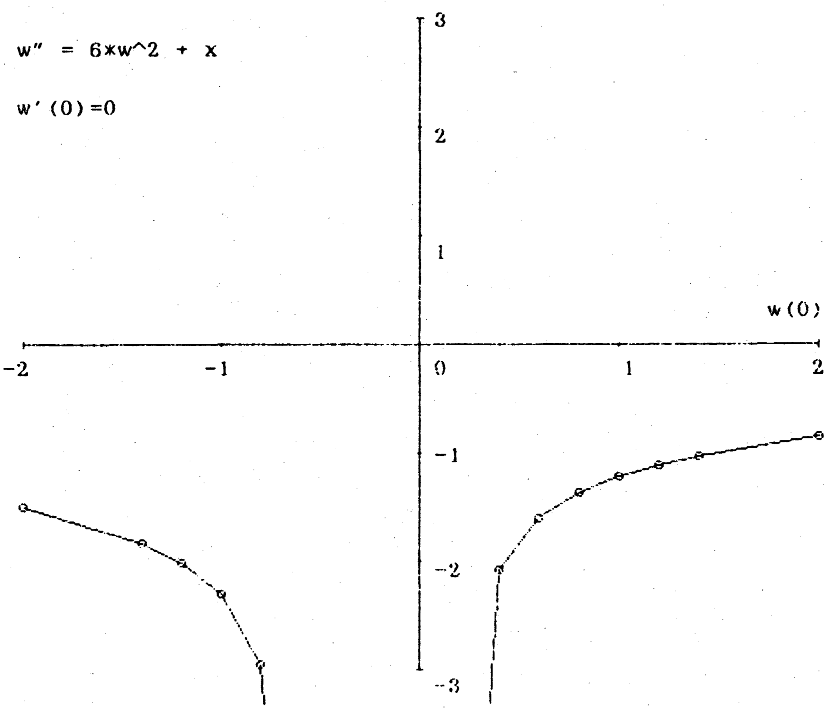
の特異点の位置はべき級数の隣合う各係数間の比により求められることが知られている（d'Alembrt の公式）が、これを引き続く３項間の関係から求めるようにして収束を早める努力をした方法が３項解析である。[5)] その解の挙動が複雑である Painleve-I 型方程式

$$w'' = 6w^2 + x$$

で、初期値として $w'(0) = 0$ を固定し、$w(0)$ を変化させた場合について実軸上の原点に最も近い特異点の位置を調べる。$x = 0$ から正方向に３項解析を進めた場合（次頁上図）と、$x = 0$ から負方向に進めた場合（次頁下図）との特異点の位置が計算される。初期値の変化と共に特異点の位置が変化する様子が良く分かる。計算の煩雑さに関しても、上の問題の特異点の位置を他の微分方程式の零点を求める問題に変数変換する手法など[6)]に比べても、収束速度は劣るもののはるかに手直に特異点の位置の概略を知ることが出来る。

この問題では初期値 $w(0)$ をパラメータとみなして、それを変化さすだけで同一の形式解を用いている。より一般にパラメータを含む微分方程式を取り扱う場合にはこのようにハイブリッド処理での Taylor 級数法の良さがより明確になると思われる。


3
2
1
r(w(0)=0, w'(0))=2.615···
w(0)
-2
-1
0
1
2
w" = 6*w^2 + x
w'(0)=0


3
w" = 6*w^2 + x
w'(0)=0
2
1
w(0)
-2
-1
0
1
2
-1
-2
-3

4. 結び

以上、本論ではPROLOGを記述言語とした小型のハイブリッド処理システムとその上での常微分方程式のハイブリッド解法について述べた。

ハイブリッド処理システムは数値計算との結合が容易な数式処理システムであり、数式の入力、簡素化、色々な記号計算等を遂行するとともに数値計算用のプログラム（FORTRANによる）の出力、あるいはその実行までもをシステム内で行うものである。また、数式の出力も見やすい２次元出力がなされ、FORTRANプログラムの作成に際しては数値計算の演算量の少ないhorner法が採用される。

常微分方程式の解法としては、数値計算の分野ではその記号処理の煩雑さにより、一般的でなかったTaylor級数法を考えた。これをハイブリッド処理システムに導入することにより数式的に形式解を得ることはもちろん、そのFORTRANプログラムを発生させ得る。さらに、作成されたFORTRANプログラムの翻訳やシステムに蓄えられている他のプログラムとの結合および数値計算の実行までをシステム内で行うことが出来る。得られた数値解に対する考察により以下の結論を得る。ハイブリッド処理システム上のTaylor級数法は、常微分方程式の解法としては最も一般的なRunge-Kutta法と十分に比較し得るものである。Runge-Kutta法では精度の良い解を得るのに多くの労力を要するようないくつかの問題ではTaylor級数法に

よる方がはるかに効率的である。

システムのより一層の向上のため、現在

1）基本となるデータ構造の改良

2）PROLOG 処理系の高速化

3）利用者とのインターフェースの設計

等の点について検討中である。

参考文献

1)野田、戒能：数式処理通信,3(1985)

2)D.Barton,I.M.Willers and R.V.M.Zahar; in "Mathematical Software" ed. J.Rice, Academic Press(1971)

3)G.Kedem; ACM Trans.Math.Soft,6(1980)

4)D.Barton; ACM Trans.Math.Soft,6,(1980)

5)G.Corliss and Y.F.Chang; ACM Trans.Math.Soft,8(1982)

6)Y.Kametaka and M.T.Noda; Japan J. Appl. Math.,3,(1986)